

## ABSTRAKT

Univerzita Karlova v Praze

Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv

**Kandidát:** Klára Suchanová

**Školitel:** doc. dr. Marko Anderluh, mag. farm.; PharmDr. Petr Zimčík, Ph.D.

**Název diplomové práce:** Návrh a syntéza inhibitorů DDI založených  
na isothiazolidinonovém jádře

Tato práce je zaměřená na D-Ala-D-Ala ligázu (DDI), enzym z alaninové boční cesty syntézy bakteriální buněčné stěny. Potenciální DDI inhibitory byly navrženy s pomocí dokovacího softwaru (AutoDock 4.05, The Scripps Research Institute, La Jolla, USA), rentgenových struktur DDI (1IOW a 1IOV, PDB), jejích přirozených substrátů/produktů a známých publikovaných inhibitorů. Tato práce je součástí projektu EUR-INTAFAR (Inhibition of New TArgets for Fighting Antibiotic Resistance), zaměřeného na lepší pochopení fyziologie a biochemie bakteriální buněčné stavby, biosyntézy peptidoglykanu a objevování nových antibakteriálních látek. Podle *in silico* návrhu bylo připraveno pět konečných produktů s isothiazolidinonovým jádrem a ohodnoceno v biologickém testování pro určení jejich DDI inhibičního účinku.